На правах рукописи

Шишкин Владимир Андреевич

ДОКАЗАТЕЛЬНЫЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ В ИССЛЕДОВАНИИ ВАРИАЦИОННЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ КВАДРАТИЧНЫХ ФУНКЦИОНАЛОВ

05.13.18 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата физико–математических наук

Екатеринбург — 2009

Работа выполнена на кафедре информационных систем и математических методов в экономике экономического факультета Пермского государственного университета

Научный руководитель:	доктор физико–математических наук, профессор **Максимов Владимир Петрович**
Официальные оппоненты:	доктор физико–математических наук, профессор **Дерр Василий Яковлевич**
	кандидат технических наук, ст. научный сотрудник **Кумков Сергей Иванович**
Ведущая организация:	Институт математического моделирования РАН, г. Москва

Защита состоится «___» ___________ 2009 г. в ___ часов на заседании диссертационного совета Д 212.286.10 при Уральском государственном университете им. А. М. Горького: 620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51, комн. 248.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Уральского государственного университета им. А. М. Горького.

Автореферат разослан «___» ___________ 2009 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета
доктор физико–математических наук,
профессор Пименов В. Г.

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Изучение поведения динамических систем в естественных, технических и экономических науках часто приводит к задачам, где будущее зависит не только от настоящего состояния системы, но также и от предыстории развития (см., например, монографию Е. Н. Чукву[1]). При построении достаточно точных моделей сложных систем во многих случаях приходится учитывать запаздывание, возникающее вследствие конечной скорости распространения информации и материальных ресурсов. Кроме того в некоторых задачах требуется учитывать ещё и будущее состояние системы (в статье Дж. А. Уилера и Р. П. Фейнмана[2] и следующей за ней статье Л. С. Шульмана[3] рассматривается движение взаимодействующих заряженных частиц, когда скорость распространения взаимодействий ограничена скоростью света). Всё это приводит к тому, что при формулировке задач оптимизации для таких систем приходится применять функционалы не только с локальными, но и с нелокальными операторами (см., например, работу Г. А. Каменского и А. Л. Скубачевского[4]).

Одним из наиболее хорошо теоретически исследованных классов экстремальных задач являются вариационные задачи для квадратичных функционалов. Реальные задачи, математическими моделями которых являются задачи оптимизации квадратичных функционалов, сравнительно немногочисленны. Однако такие задачи возникают как вспомогательные при решении задач нелинейной оптимизации, когда нелинейный функционал аппроксимируется квадратичным в некоторой окрестности пробного решения.

Классический подход к управлению линейными системами с квад-

[1]Chukwu E. N. Stability and time–optimal control of hereditary systems — USA, Academic Press, Inc., 1992. — 509 p.

[2]Wheeler J. A., Feynman R. P. Interaction with the Absorber as the Mechanism of Radiation. // Reviews of Modern Physics, Vol. 17, No 2 and 3, July 1945. — pp. 157–179.

[3]Schulman L. S. Some differential–difference equations containing both advance and retardation. // J. Math. Phys., Vol. 15, No 3, March 1974. — pp. 295–298.

[4]Каменский Г. А., Скубачевский А. Л. Экстремумы функционалов с отклоняющимися аргументами. — М.: МАИ, 1979. — 54 с.

ратичным функционалом описан, например, в работе В. Н. Афанасьева, В. Б. Колмановского и В. Р. Носова[5]. Подробное решение задачи о минимизации квадратичного функционала на основе идей и результатов теории абстрактного функционально–дифференциального уравнения, развитых в работах Пермского семинара, излагается в монографиях Н. В. Азбелева, В. П. Максимова и Л. Ф. Рахматуллиной [6], Н. В. Азбелева, С. Ю. Култышева и В. З. Цалюка[7]. Редукция исходной задачи к задаче минимизации в гильбертовом пространстве описывается в статье А. А. Груздева[8] и в книге С. А. Гусаренко[9].

Изучение реальных систем нередко приводит к задачам оптимизации, сложность которых существенно затрудняет или даже делает практически невозможным исследование их «вручную». Если же конкретная задача и допускает применение теоретических критериев разрешимости, то имеющиеся достаточные условия часто оказываются слишком грубыми и дающими практический результат лишь в исключительных случаях.

При решении сложных задач стандартным подходом в математике служит замена исходной задачи близкой к ней приближённой, которая являлась бы в каком-то смысле более простой. В ходе исследования таких приближённых задач используются как фундаментальные положения общей теории и так и возможности современных вычислительных систем. Для обоснованного вывода о разрешимости исходной задачи и построения приближённого решения требуются специальные методы, теоремы и современные вычислительные технологии. Разработка таких методов и технологий является актуальной зада-

[5] Афанасьев В. Н., Колмановский В. Б., Носов В. Р. Математическая теория конструирования систем управления. — М.: Высш. шк., 1998. — 574 с.

[6] Азбелев Н. В., Максимов В. П., Рахматуллина Л. Ф. Элементы современной теории функционально–дифференциальных уравнений. Методы и приложения. — М.: Институт компьютерных исследований, 2002. — 384 с.

[7] Азбелев Н. В., Култышев С. Ю., Цалюк В. З. Функционально–дифференциальные уравнения и вариационные задачи. — Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. — 122 с.

[8] Груздев А. А. О редукции экстремальных задач к линейным уравнениям в гильбертовом пространстве. // *Изв. ВУЗов. Математика.* — 1993. — № 5 (372). — с. 36–42.

[9] Гусаренко С. А. Оптимальное управление: экстремальные и вариационные задачи. — Пермь: Перм. ун-т, Перм. техн. ун-т, 2001. — 86 с.

чей. Решению этой проблемы для одного класса вариационных задач посвящена настоящая диссертация.

Технология доказательного вычислительного эксперимента основана на применении методов конструктивной математики, когда наряду с доказательством существования объектов также рассматривается ещё и возможность их построения. Работа при этом ведётся со специальными вычислительными объектами, которые позволяют гарантированно учитывать ошибки, возникающие в ходе вычислений.

Возможно, первые предложения по автоматическому анализу ошибок и верификации результатов компьютерных вычислений появились в конце 50-х — начале 60-х годов прошлого века в работах Реймона Мура (см., например, Р. Е. Мур[10]). Для этого было предложено использовать интервальное представление результатов вычислений. В частности, было показано, как можно применить такой подход при решении систем линейных алгебраических уравнений и обыкновенных дифференциальных уравнений.

В дальнейшем применение интервальных методов развивалось многими математиками. Можно отметить, например, труды Е. Каучера и др.[11], У. Кулиша, В. Л. Миранкера[12], А. Ньюмайера[13]. На русском языке хороший обзор интервальных методов можно найти в монографии Г. Алефельда и Ю. Херцбергера[14].

В трудах С. П. Шарого рассматривается применение интерваль-

[10] Moore, R. E. Interval arithmetic and automatic analysis in digital computing / R. E. Moore / Stanford Univercity. — Stanford: 1962. — 134 pp.; Moore, R. E. The automatic analysis and control of error in digital computation based on the use of interval numbers / R. E. Moore // Error in Digital Computation. — Vol. 1. — New York: JohnWiley & Sons, Inc., 1965. — Pp. 61—130.; Moore, R. E. Interval Analysis / R. E. Moore, C. T. Yang. — Sunnyvale, California: Lockheed Aircraft Corporation, Missiles and Space Division, 1959. — Vol. 1. — 46 pp.

[11] Kaucher, E. Computer arithmetic, scientic computation and mathematical modelling / E. Kaucher, S. M. Markov, G. Mayer // IMACS Annals on Computing and Appl. Math. — 1992. — no. 12.

[12] Kulisch, U. Computer Arithmetic in Theory and Practice / U. Kulisch, W. L. Miranker. — New York: Academic Press, 1981.

[13] Neumaier, A. Interval Methods for Systems of Equations / A. Neumaier. — Cambridge: Cambridge Univercity Press, 1990.

[14] Алефельд Г. Введение в интервальные вычисления / Г. Алефельд, Ю. Херцбергер. — М.: Мир, 1987. — 360 с.

ных методов при решении систем уравнений (см., например, С. П. Шарый[15]). Доказательные вычисления (вычисления с гарантированной точностью) на ЭВМ рассматривались в трудах К. И. Бабенко (см., например, К. И. Бабенко[16]) и С. К. Годунова (см., например, С. К. Годунов и др.[17]).

Другим методом гарантированных компьютерных вычислений является использование арифметики рациональных чисел. Возможность работы с дробями, числитель и знаменатель которых могут иметь произвольную длину, позволяет осуществлять точные вычисления, результат которых не содержит ошибок округления. Рациональная арифметика реализована во всех современных системах компьютерной алгебры (Maxima, Maple, Mathematica и т.п.), а также в библиотеках компьютерных программ (например, GNU MP).

Объектом исследования в работе являются задачи минимизации вида

$$\mathcal{I}x = \sum_{i=1}^{N} \langle T_{1i}x, T_{2i}x\rangle_{\mathbf{H}} + \langle F_0, x\rangle_{\mathbf{X}} \to \min, \tag{1a}$$

$$p(x) = 0, \quad q(x) \leqslant 0. \tag{1b}$$

Решение ищется в банаховом пространстве $\mathbf{X}$, изоморфном прямому произведению вещественного сепарабельного гильбертова пространства $\mathbf{H}$ и пространства m-мерных вещественных векторов $\mathbb{R}^m$. Предполагается, что T_{1i}, T_{2i}, $i = 1, \ldots, N$, — линейные ограниченные операторы, действующие из $\mathbf{X}$ в $\mathbf{H}$; $F_0 \in \mathbf{X}^*$; p и q — аффинные вектор–функционалы, определённые на $\mathbf{X}$.

Рассматриваются задачи, в которых квадратичный функционал (1a) может содержать, кроме самой функции x и её производных любого порядка, интегральные операторы, а также операторы с сосредо-

[15] Шарый С. П. Интервальные алгебраические задачи и их численное решение: Дисс... докт. физ.–мат. наук: 01.01.07. — Новосибирск, 2000. — 327 с.

[16] Бабенко К. И. Основы численного анализа / К. И. Бабенко. — Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2002. — 848 с.

[17] Гарантированная точность решения систем линейных уравнений в евклидовых пространствах / С. К. Годунов, А. Г. Антонов, О. П. Кирилюк, В. И. Костин. — Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1988. — 465 с.

точенным или/и распределённым запаздыванием (интегральные операторы Стилтьеса).

Исследуемая задача (1a)–(1b) сводится к задаче минимизации в подходящем гильбертовом пространстве

$$\mathcal{I}_1 z = \frac{1}{2}\langle Qz, z\rangle - \langle f_0, z\rangle + \psi_0 \to \min, \tag{2a}$$

$$g(z) = 0, \quad h(z) \leqslant 0, \tag{2b}$$

где Q — ограниченный самосопряжённый оператор. Рассматриваются только те задачи, в которых оператор Q можно привести к виду $Q = I - K$, когда проверка необходимых и достаточных условий существования решения сводится к исследованию обратимости и положительной определённости оператора $I - K$ интегрального уравнения Фредгольма второго рода

$$z - Kz = f(\lambda) \tag{3}$$

с вполне непрерывным самосопряжённым оператором K.

Целями диссертационного исследования являются:

1. Разработка метода конструктивного исследования вариационных задач для квадратичных функционалов.

2. Обоснование применимости предлагаемого подхода к решению вариационных задач с уравнением Эйлера в виде интегрального уравнения Фредгольма второго рода.

3. Теоретическое обоснование и разработка схемы доказательного вычислительного эксперимента, ориенированного на получение результатов с гарантированной оценкой точности решения.

4. Реализация предлагаемого конструктивного метода в виде программного комплекса для достоверной проверки необходимых и достаточных условий существования решения, а также построения приближённого решения вариационной задачи с гарантированной оценкой точности.

5. Оценка практической применимости разработанного метода к исследованию вариационных задач для квадратичных функционалов на основе его применения к тестовым модельным примерам.

6. Определение теоретических и практических границ применимости предлагаемого доказательного вычислительного эксперимента.

Методологическая и теоретическая основа исследования. С помощью метода редукции, разработанного Пермским семинаром по функционально–дифференциальным уравнениям, исходная вариационная задача сводится к задаче минимизации в подходящем гильбертовом пространстве $\mathbf{H}$. При этом существенно используется изоморфизм между исходным пространством $\mathbf{X}$ и $\mathbf{H} \times \mathbb{R}^m$.

При проверке необходимых и достаточных существования решения задачи (2a)–(2b), исследуемое уравнение Фредгольма $z - Kz = f(\lambda)$ заменяется близким уравнением $z - \tilde{K}z = \tilde{f}(\lambda)$ с конечномерным оператором $\tilde{K}$. Для этого строятся проекции K и f на конечномерные подпространства исходных пространств $\mathscr{L}(\mathbf{H})$ и $\mathbf{H}$ соответственно.

Если оператор $I - \tilde{K}$ обратим и положительно определён, то для проверки обратимости и положительной определённости исходного оператора $I - K$ используются теорема о взаимной обратимости близких по норме операторов и теорема о спектре вполне непрерывного самосопряжённого оператора с вполне непрерывным самосопряжённым возмущением.

Если доказано, что оператор $I - K$ обратим и положительно определён, строится приближённое решение, погрешность которого оценивается с помощью теоремы о норме обратного оператора возмущённого оператора.

Для исследования обратимости и положительной определённости оператора $I - K$ проводится (возможно, неоднократно) *доказательный вычислительный эксперимент*. Все вычисления в ходе эксперимента выполняются точно (рациональная арифметика) или с контролем оценки погрешности округления (интервальная арифметика с использованием направленного округления), что гарантирует достоверность полученных результатов.

Научная новизна исследования:

1. Разработан новый, ориентированный на использование современных вычислительных средств метод исследования вариационных задач для квадратичных функционалов с нелокальным интегрантом, позволяющий получить приближённое решение задачи и гарантированную оценку точности решения.

2. Дано теоретическое обоснование применимости предлагаемого метода к решению одного класса вариационных задач.

3. Разработана схема доказательного вычислительного эксперимента.

4. Достоверность результатов доказательного вычислительного эксперимента гарантируется его строгим теоретическим обоснованием и контролируемой точностью всех вычислительных процедур.

Апробация результатов исследования. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на

1. Пермском городском семинаре по функционально–дифференциальным уравнениям (1995–2006, руководитель — проф. Азбелев Н. В.);

2. Ижевском семинаре по дифференциальным уравнениям и задачам управления (1999, руководитель — проф. Тонков Е. Л.);

3. Семинаре Лаборатории конструктивных методов исследования динамических моделей (в 2005 и 2008 гг., руководитель — проф. Максимов В. П.);

4. Пермском городском теоретическом семинаре “Фундаментальные и прикладные модели управления экономикой” (2006, руководители — проф. Аверин В. И. и проф. Перский Ю. К.);

5. Международной конференции “Информационные технологии в инновационных проектах” (Ижевск, 1999);

6. III Всероссийском семинаре “Теория сеточных методов для нелинейных краевых задач” (Казань, 2000);

7. Региональной конференции “Экономика и управление: актуальные проблемы и поиск путей решения” (Пермь, 2004);

8. IV Международном конгрессе по математическому моделированию (Нижний Новгород, 2004);

9. Конференции “Современные проблемы прикладной математики и математического моделирования” (Воронеж, 2005).

Исследования проведены при поддержке Программы “Университеты России — Фундаментальные исследования” (015.03.01.25, УР. 03.01.023) и РФФИ (07-01-96.060-р-урал-а, 04-01-96016-р-урал-а, 99-01-01278-а).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 9 статьях, в том числе в 5 журнальных публикациях и в 4 материалах российских и международных конференций.

Диссертация содержит только те результаты совместных работ, которые принадлежат автору диссертационной работы.

Структура и объём работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы и приложения. Объём работы составляет 101 страницу, включая библиографический список из 49 названий.

Содержание работы

Во введении дано обоснование актуальности темы исследования, кратко описаны цели и задачи работы.

В первой главе приводятся примеры вариационных задач для квадратичных функционалов. Кратко описывается разработанный Пермским семинаром по функционально–дифференциальным уравнениям подход к исследованию задачи минимизации квадратичного функционала. Даётся описание методов конструктивной математики.

Вторая глава посвящена общему описанию предлагаемого метода исследования применительно к абстрактной вариационной задаче для квадратичного функционала.

$$\mathcal{I}x = \sum_{i=1}^{N} \langle T_{1i}x, T_{2i}x \rangle_{\mathbf{H}} + \langle F_0, x \rangle_{\mathbf{X}} \to \min,$$
$$p(x) = 0, \quad q(x) \leqslant 0.$$

С помощью метода редукции, предложенного Пермским семинаром по функционально–дифференциальным уравнениям, исходная вариационная задача сводится к задаче минимизации в гильбертовом пространстве. При этом предполагается, что пространство $\mathbf{X}$, в котором ищется решение, изоморфно прямому произведению вещественного сепарабельного гильбертова пространства $\mathbf{H}$ и пространства m-мерных вещественных векторов $\mathbb{R}^m$:

$$x = \Lambda z + Y\alpha', \quad z \in \mathbf{H},\ \alpha' \in \mathbb{R}^m.$$

В рамках теории абстрактного функционально–дифференциального уравнения[18] устанавливается, что для заданного набора краевых условий всегда можно построить разрешимую краевую задачу

$$\delta x = z, \quad rx = \alpha',$$

[18] Azbelev N. V., Rakhmatullina L. F. Theory of linear abstract functional differential equations and applications // Memoirs on Differential Equations and Mathematical Physics. — Tbilisi, 1996, Vol. 6. — pp. 1–102.

и, таким образом, с помощью пары операторов $[\delta, r]\colon \mathbf{X} \to \mathbf{H} \times \mathbb{R}^m$ определить изоморфизм $\mathbf{X} \simeq \mathbf{H} \times \mathbb{R}^m$. В этом случае пара $\{\Lambda, Y\}\colon \mathbf{H} \times \mathbb{R}^m \to \mathbf{X}$ является обратным оператором по отношению к $[\delta, r]$. Так как ограничения $rx = \alpha'$ выбираются из множества ограничений $p(x) = 0$, то также предполагается, что система ограничений задачи регулярна и при этом число ограничений–равенств не меньше m.

В работе рассматриваются задачи, исследование необходимых и достаточных критериев существования решений которых сводится к определению разрешимости интегрального уравнения Фредгольма второго рода $z - Kz = f(\lambda)$ (интегральное уравнение Эйлера) и проверке (строгой) положительной определённости оператора $I - K$. При этом используется то, что оператор K по построению является ограниченным самосопряжённым линейным оператором.

В этой главе описывается идеализированный вариант исследования задачи, когда все вычисления выполняются точно. Конструктивному варианту данного метода, учитывающему ошибки округления и ошибки численных методов, посвящена третья глава.

Для проверки необходимых и достаточных условий существования решения предлагается заменить исходный объект (3) более простым — уравнением Фредгольма второго рода с конечномерным ядром. Приближённое уравнение $z - \tilde{K}z = \tilde{f}(\lambda)$ строится с помощью проекции на подпространства, натянутые на подмножества заданной полной системы функций $\{\phi_i\}_1^\infty$, ортогональных с единичным весом. Таким образом

$$\tilde{K}_n z = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \frac{\langle z, \phi_j \rangle \langle K\phi_j, \phi_i \rangle}{\langle \phi_j, \phi_j \rangle \langle \phi_i, \phi_i \rangle} \phi_i$$

и

$$\tilde{f}_n = \sum_{i=1}^{n} \frac{\langle z f \phi_i \rangle}{\langle \phi_i, \phi_i \rangle} \phi_i.$$

В качестве базиса аппроксимации предлагается использовать ортогональные функции, так как в этом случае при проверке разрешимости приближённого интегрального уравнения и оценке верхней границы спектра интегрального оператора, матрицы, соответствующие конечномерным операторам, будут иметь меньшую размерность.

При выборе функций, ортогональных с единичным весом, вычисление коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений, соответствующей интегральному уравнению, сводится к простому сложению.

Если уравнение $z - \tilde{K}_n z = \tilde{y}_n$ имеет решение, то проверка разрешимости исходного уравнения осуществляется с помощью сравнения $\|K - \tilde{K}_n\|_{\mathscr{L}(\mathbf{H}_n)}$ и $\|(I - \tilde{K}_n)^{-1}\|^{-1}_{\mathscr{L}(\mathbf{H}_n)}$. Так как множество обратимых линейных ограниченных операторов является открытым, то, при достаточной близости K и $\tilde{K}_n$, из существования $\tilde{K}_n^{-1}$ следует существование K^{-1}. Заметим, что можно доказать только существование решения, так как если оператор K необратим, то данный метод не может дать никакого ответа.

Для проверки достаточного условия существования решения исходной вариационной задачи оценивается нижняя граница спектра оператора $I - K$. Так как операторы K и $\tilde{K}_n$ по построению являются самосопряжёнными, то границы их спектров различаются не больше, чем на $\|K - \tilde{K}_n\|_{\mathscr{L}(\mathbf{H}_n)}$. Таким образом, если величина наибольшего собственного числа оператора $\tilde{K}_n$ строго меньше $1 - \|K - \tilde{K}_n\|_{\mathscr{L}(\mathbf{H}_n)}$, то оператор K строго положительно определён. Если наибольшее собственное число больше $1 + \|K - \tilde{K}_n\|_{\mathscr{L}(\mathbf{H}_n)}$, то K не будет положительно определён. В противном случае, т.е. когда наибольшее собственное число лежит в интервале $[1 - \|K - \tilde{K}_n\|_{\mathscr{L}(\mathbf{H}_n)}, 1 + \|K - \tilde{K}_n\|_{\mathscr{L}(\mathbf{H}_n)}]$, требуются повысить точность аппроксимации, увеличив n. Заметим, что ситуация равенства наибольшего собственное числа единице на этом этапе невозможна, так как в этом случае невозможно выполнение необходимого условия существования решения.

Если необходимые и достаточные условия существования решения выполнены, строится точное (без погрешностей) решение приближённого уравнения $\tilde{z}$ и оценивается норма разности между $\tilde{z}$ и истинным решением исходной задачи z. После этого определяется приближённое решение $\tilde{x} = G\tilde{z} + Y\alpha'$ исходной вариационной задачи.

В третьей главе описывается конструктивная реализация предлагаемого подхода для пространства $\mathbf{H} = \mathbf{L}_2[a, b]$.

При *конструктивном* подходе к решению задачи рассматриваются не только утверждения о существовании решения, но и возможность его построения.

Здесь и далее предполагается, что уравнение Эйлера $z-Kz=f(\lambda)$ является интегральным уравнением Фредгольма второго рода.

Так как непосредственное решение полученного уравнения $z-Kz=f(\lambda)$ часто затрудняется сложностью ядра интегрального оператора, исходное уравнение заменяется приближённым уравнением $z-\tilde{K}z=f$ с близким к K по норме конечномерным оператором $\tilde{K}$. *Конструктивность* предлагаемого подхода заключается в том, что при положительном ответе на вопрос о существовании решения, оно вычисляется с гарантированной оценкой нормы погрешности (точнее, процесс доказательства существования является частью процесса построения решения). Для этого приближённое уравнение должно иметь вид

$$z-\tilde{K}z=\tilde{f}(\lambda),$$

где ядро оператора $\tilde{K}$ вместе с правой частью уравнения $\tilde{f}(\lambda)$ являются компьютерно–вычислимыми функциями, то есть функциями, значение которых может быть вычислено точно или с гарантированной оценкой погрешности. Такими свойствами обладают, например, многочлены с рациональными или интервальными коэффициентами, если при расчётах используется арифметика рациональных чисел или интервальная арифметика.

Для построения $\tilde{K}$ и $\tilde{f}$ определяются проекции K и f на подходящие n-мерные пространства $\mathscr{L}(\mathbf{H}_n)$ и $\mathbf{H}_n$. Для того, чтобы результат был компьютерно–вычислим, в качестве базиса аппроксимации могут быть использованы ортогональные многочлены Лагранжа или ортогональные функции Радемахера–Уолша (коэффициенты многочленов и координаты точек разрывов хранятся в виде рациональных чисел).

Если оказалось, что при первоначальном выборе n — размерности используемого подпространства, — точность аппроксимации недостаточна, то выбор бóльшей размерности $n' > n$ позволяет повысить точность, причём требуется вычислить только $n'-n$ (для f) и $(n')^2-n^2$ (для K) коэффициентов, а с учётом симметричности ядра $\approx \big((n')^2-n^2\big)/2$.

Достаточно часто ядро интегрального оператора K является непрерывным на области определения $K(t,s)$. При этом, согласно теореме

Вейерштрасса, полиномиальные приближения $\tilde{K}(t, s)$ равномерно сходятся к $K(t, s)$ при увеличении степени аппроксимации.

Для решения приближённого параметризованного интегрального уравнения Эйлера применяется стандартный метод сведе́ния его к системе линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Показано, что при выборе в качестве базиса системы ортогональных многочленов с единичным весом, для определения элементов матрицы системы и вектора правой части используются только арифметические операции и не требуется интегрирование. Размерность СЛАУ также оказывается существенно меньше, чем при выборе какого-либо другого стандартного базиса.

Описаны два подхода к решению системы линейных алгебраических уравнений с учётом погрешностей аппроксимации.

Первый подход основан на представлении СЛАУ в виде $(A+\Delta A)Z = (B + \Delta B)$, где A и B — середины интервальных оценок, а элементами ΔA и ΔB являются интервалы. Система $AZ = B$ с помощью рациональной арифметики решается точно, после чего оценивается возможная погрешность, вызванная наличием ΔA и ΔB.

Второй подход — прямое решение СЛАУ с интервальными элементами с помощью, например, интервальной модификации метода Гаусса.

После решения СЛАУ определяется норма конечномерного оператора $(I - \tilde{K})^{-1} = I + R$ и гарантированно, хотя и грубо, оценивается норма оператора погрешности аппроксимации $K - \tilde{K}$.

Для оценки верхней границы спектра оператора K также используется конечномерный оператор $\tilde{K}$. Уравнение $\tilde{K}z = \sigma z$ сводится к системе линейных алгебраических уравнений, и вычисляется определитель матрицы коэффициентов — характеристический многочлен матрицы $E-A$. Хотя матрица системы и не будет в общем случае симметричной, вследствие самосопряжённости (по построению) оператора $\tilde{K}$ все корни характеристического многочлена будут вещественными числами.

Вычисление характеристического многочлена выполняется с использованием рациональной арифметики. Для оценки сверху значения наибольшего собственного числа используется метод Ньютона.

Полученные результаты представлены в виде формул, готовых для программной реализации на выбранном языке программирования.

В конце главы рассматривается обобщение на случай функций нескольких переменных: $\mathbf{H} = L_2([a_1, b_1] \times \cdots \times [a_d, b_d])$.

Четвёртая глава посвящена описанию некоторых особенностей программной реализации.

Программирование осуществлялось на языке C++, который сочетает высокую скорость работы получаемых программ с возможностью написания объектно–ориентированных программ. Для компиляции применялся набор компиляторов GNU GCC 4.3.2 (операционная система Linux Fedora 10 x86_64).

Использование параллельных вычислений позволяет существенно снизить время счёта. Для создания процедур, использующих многопоточность, использовались библиотеки `PTHREADS` и `OpenMP`, предназначенные для работы на машинах с общей памятью. Параллельные вычисления используются при численном интегрировании, а также при работе с матрицами.

Арифметические вычисления с рациональными числами используют библиотеку `GNU MP` и её интерфейсный класс `mpq_class`, применение которого позволяет записывать арифметические выражения в естественном виде. Для интервальных вычислений был создан класс `INTERVAL`, который использует поддерживаемые аппаратно арифметические вычисления с направленным округлением.

Часть расчётов выполнялась с использованием математического пакета GNU Octave. Этот же пакет использовался для создания двух- и трёхмерных графиков. При проверке результатов применялся пакет компьютерной алгебры `Maxima`.

При работе над диссертацией (выполнение расчётов и оформление результатов) использовалось свободно доступное программное обеспечение.

В пятой главе приводятся результаты доказательного вычислительного эксперимента, полученные при исследовании модельных вариационных задач.

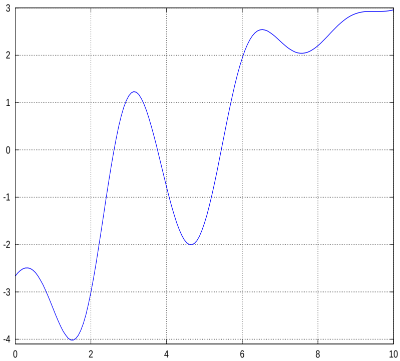
Классическая вариационная задача Лагранжа с локальным интегрантом

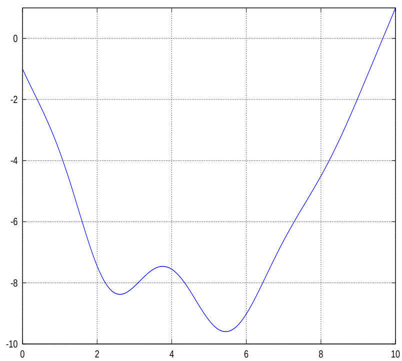
$$\mathcal{I}(x) = \int_a^b \big(\dot{x}(t)^2 + p(t)x(t)^2 + q(t)x(t)\big)\ \mathrm{d}t \to \min,$$
$$x(a) = \alpha_1, \quad x(b) = \alpha_2,$$

используется для сравнения классического решения с решением, полученным в ходе доказательного вычислительного эксперимента.

Графики приближённых решений интегрального уравнения z и исходной задачи x для

$$a = 0,\ b = 10,\ p(t) = \sin(2t)\exp(-t/5),\ q(t) = 1 + \cos(t),$$





Более сложный вариант — задача с нелокальным интегрантом (функции с сосредоточенным отклонением аргумента):

$$\mathcal{I}(x) = \int_a^b \Big(\dot{x}(t)^2 + p(t)x(t)^2 + q(t)x(t) + \underline{g(t)x\big(h_1(t)\big)x\big(h_2(t)\big)}\Big)\ \mathrm{d}t \to \min,$$
$$x(\xi) = \phi_1(\xi),\ \xi < a, \quad x(\xi) = \phi_2(\xi),\ \xi > b,$$
$$x(a) = \alpha_1, \quad x(b) = \alpha_2.$$

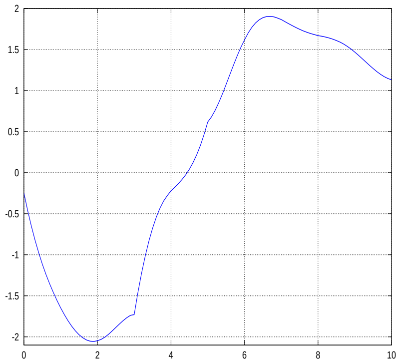
Для реализации была выбрана задача с постоянным отклонением аргумента:

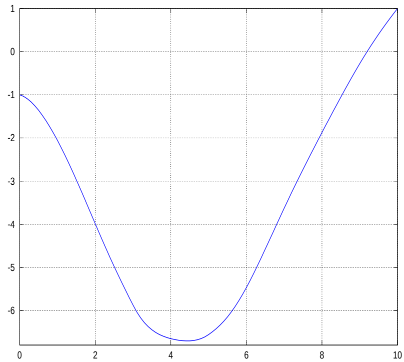
$$h_1(t) = t - \beta_1, \quad h_2(t) = t + \beta_2.$$

В этом случае ядро интегрального оператора может быть записано в явном виде, без использования интегралов.

Графики приближённых решений интегрального уравнения z и исходной задачи x при

$$g(t) = \frac{5}{t^2+1} \text{ и } \beta_1 = 2,\ \beta_2 = 3.$$





Пример вывода программы:

```
...
Вычисление множителей Лагранжа... Ok
lambda = [-2.2617755252867937088;-2.2617755243554711342]
Собираем приближённое решение интегрального уравнения... Ok
||tilde z|| = [4.6253698739152611097;4.6253698747206657416]
Собираем приближённое решение вариационной задачи... Ok
||tilde x|| = [13.763986684880748612;13.763986687045989044]
Оценка норм  приближений... Ok
||tilde F|| = [7.8466967066809925058;7.8466967076305111917]
||tilde K|| = [3.0774280508222049413;3.0774280514274656717]
Генерируем данные для графиков... Ok
Оцениваем погрешность аппроксимации f...Ok
max DeltaF = 0.0047890589313741563013
||DeltaF|| = 0.0070844645098475627249
Оцениваем погрешность аппроксимации K...Ok
max DeltaK = 0.024563257491638651844
||DeltaK|| = 0.074413434498845386272
Оцениваем квадрат нормы резольвентного оператора... Ok
||R|| = [1.9771270453048617188;1.9771270640409375208]
1/(1+||R||) = [0.33589429624232166135;0.33589429835621901951]
||z - tilde z|| <= 0.027093625371319605128
Вычисление характеристического многочлена для E-A... Ok
Все корни внутри круга радиуса 3.2262549204251564916
Оцениваем верхнюю границу спектра... Ok
```

```
max sigma <= 0.64087265934202963802
Успешное завершение
Затрачено 47.07сек.
```

Заключение содержит основные результаты и выводы работы, приведённые ниже.

В приложении приведены тексты компьютерных программ с краткими комментариями.

Основные результаты и выводы работы

В диссертационной работе рассмотрены возможности применения доказательного вычислительного эксперимента при исследовании вариационных задач для квадратичных функционалов. В основе работы лежит разработанный Пермским городским семинаром по функционально–дифференциальным уравнениям метод, позволяющий редуцировать задачу условной минимизации в банаховом пространстве к задаче безусловной минимизации в гильбертовом пространстве.

В работе рассмотрены дальнейшие возможные действия, когда требуется получить решение поставленной задачи. Показано, как с помощью доказательного вычислительного эксперимента можно проверить необходимые и достаточные условия существования решения. Если доказано, что искомое решение существует, то, опять же с помощью доказательных вычислений, строится приближённое решение и гарантированно оценивается его точность.

Предлагаемый метод не всегда позволяет получить решение задачи, даже если оно существует. Возможные причины:

1. оператор Q не может быть представлен в виде разности $I-K$, где I — тождественный оператор, K — самосопряжённый вполне непрерывный оператор;.

2. оператор $I-K$ не является регулярным;.

3. спектр оператора $I-K$ не содержит нулевых собственных чисел, однако в ходе вычислительного эксперимента не удаётся постро-

ить такой приближённый конечномерный оператор K_n, чтобы было выполнено условие $\|K - K_n\| < 1/\|(I - K_n)^{-1}\|$;

4. система линейных алгебраических уравнений, к которой сводится интегральное уравнение, имеет настолько большую размерность, что с помощью имеющейся в наличии вычислительной техники не удаётся получить её решение, построить характеристический многочлен матрицы коэффициентов, построить систему Штурма или оценить норму резольвентного оператора за приемлемое время.

Список публикаций автора по теме диссертации

Статья, опубликованная в ведущем рецензируемом научном журнале, определённом ВАК:

1. Шишкин В. А. Вариационные задачи для квадратичных функционалов. Доказательный вычислительный эксперимент // Вестник Тамбовского университета. Серия Естественные и технические науки. Тамбов, 2006. Т. 11. Выпуск 3. — С. 268–269.

Другие публикации:

2. Максимов В. П., Румянцев А. Н., Шишкин В. А. Вычислительный эксперимент при оптимизации процессов с сегрегацией // Журнал физической химии. Том 71, № 10. 1997. — С. 1913-1916.

3. Шишкин В. А. Использование принципа расширения при решении задач оптимизации в условиях неопределённости // Экономическая кибернетика: математические и инструментальные методы анализа, прогнозирования и управления — Пермь, 2004. — С. 153–156.

4. Шишкин В. А. Конструктивный подход к исследованию вариационных задач для квадратичных функционалов // Экономическая кибернетика: методы и средства эффективного управления — Пермь, 2000. — С. 90–94.

5. Шишкин В. А. Конструктивный подход к исследованию вариационных задач для квадратичных функционалов // Материалы Всероссийского семинара "Теория сеточных методов для нелинейных краевых задач" — Казань, 2000. — С. 135-137.

6. Шишкин В. А. Конструктивный подход к исследованию вариационных задач для квадратичных функционалов и его компьютерная реализация // Материалы докладов. Международная конференция "Информационные технологии в инновационных проектах" — Ижевск, 1999. — С. 155-157.

7. Шишкин В. А. Вариационные задачи для квадратичных функционалов. Доказательный вычислительный эксперимент // Современные проблемы прикладной математики и математического моделирования: Материалы конференции. — Воронеж: Воронежская государственная академия, 2005. — С. 246.

8. Maksimov V. P., Rumyantsev A. N., Shishkin V. A. On Constructing Solutions of Functional Differential Systems with a Guaranteed Precision // Functional Differential Equations. — Israel. 1995. Vol. 3. № 1–2. — PP. 135-144.

9. Shishkin V. A. Computer-Assisted Study of Variational Problems with Quadratic Functionals // Book of Abstracts. VI International Congress of Mathematical Modeling — University of Nizhny Novgorod, 2004. — P. 123.